第27卷 第2期　　工 程 数 学 学 报　　Vol. 27 No. 2
2010年04月　　CHINESE JOURNAL OF ENGINEERING MATHEMATICS　　Apr. 2010

文章编号:1005-3085(2010)02-0271-06

非线性Schrödinger方程的显式模守恒格式*

孙建强[1]，秦孟兆[2]

(1- 海南大学信息科学技术学院，海口 570228; 2- 中国科学院计算数学研究所，北京 100080)

摘　要: 本文采用Magnus方法求解非线性Schrödinger方程。Schrödinger方程具有模平方守恒特性，用适当差分格式对其进行模平方守恒空间离散，转化成模平方守恒的常微分方程组，再用Magnus方法求解。数值结果表明Magnus方法能保非线性Schrödinger方程模守恒量的优越性和好的稳定性。Magnus方法可应用到其它模守恒的微分方程。

关键词: 非线性Schrödinger方程；Magnus方法；模平方守恒格式

分类号: **AMS**(2000) 65N30; 65N99　　**中图分类号**: O241.5　　**文献标识码**: A

1　引言

近年来对数学和物理中的微分方程数值模拟时，不仅要能正确地模拟微分方程的变化行为，而且要使数值解能尽量地保持微分方程的某些固有特性，如非线性Schrödinger方程

$$\mathrm{i}\,\psi_t+\psi_{xx}+a|\psi|^2\psi=0, \tag{1}$$

初始条件$\psi(x,0)=\psi_0(x)$，$x\in\mathbf{R}$。$a>0$是常数。方程(1)是孤立子理论中最重要的可积模型，广泛应用在物理中的许多领域，包括非线性光学和等离子体物理。方程(1)具有守恒特性

$$Q=\int_{-\infty}^{\infty}\big|\psi(x,t)\big|^2\mathrm{d}x=Q_0, \tag{2}$$

$$E=\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\Big|\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|^2+\frac{q}{2}|\psi|^4\Big]\mathrm{d}x=E_0, \tag{3}$$

其中Q_0和E_0是常数。Sanz-Serna 提出了蛙跳格式和改进的Crank-Nilcolson格式求解 Schrödinger方程，讨论了这些格式是否保方程的守恒特性[1]。在文献[2,3]中，提出了新的模守恒差分格式求解Schrödinger方程。然而常见的差分格式一般都是隐式的，精度上低阶。

近年来在计算数学领域内产生了一个新的分支—保结构算法。该方法不仅具有经典算法的高阶精度，稳定性，健壮性，长时间精确模拟微分方程的变化行为，并能保微分方程的一些内部守恒特性，其中包括冯康和其保结构算法研究组成员发展的辛算法，在辛算法基础上提出的多辛算法，和挪威的Munthe-Kaas，英国的Iserles等人发展了保一般李群方程不变性的李群方法[1,4,5]。李群方法包括常见的RKMK方法，Magnus方法，Fer方法等。在这里，利用李群方法中的Magnus方法构造了模平方守恒格式，用Runge-Kutta方法和Magnus方法求解Schrödinger方程，比较两方法是否保Schrödinger方程的守恒特性。

收稿日期: 2006-07-07. **作者简介**: 孙建强(1971年9月生)，男，博士，副研究员. 研究方向：微分方程的数值求解.
***基金项目**: 国家自然科学基金(10401033; 10471145)；海南大学引进高层次人才科研启动费项目.

2 非线性 Schrödinger 方程的离散

取 $\psi = p + \mathrm{i}q$，非线性 Schrödinger 方程 (1) 等价于

$$p_t + q_{xx} + a(p^2 + q^2)q = 0, \tag{4}$$

$$q_t - p_{xx} - a(p^2 + q^2)p = 0. \tag{5}$$

方程 (1) 具有

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \mathrm{d}x = a$$

的守恒特性。数值离散时，要使离散格式尽量保持方程变量的离散守恒，能反映方程 (1) 的守恒特性。

方程 (4)-(5) 变为

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{z}}{\mathrm{d}t} = J\mathcal{A}\tilde{z}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{D} & 0 \\ 0 & \mathcal{D} \end{pmatrix}, \tag{6}$$

其中

$$\tilde{z} = (p, q)^T, \quad \mathcal{D} = -cI - \frac{\partial}{\partial x^2}$$

是一个微分算子，$c = a(p^2 + q^2)$ 和 I 是单位算子。对方程 (6) 进行适当空间离散。设对 $\frac{\partial}{\partial x^2}$ 取二阶中心差分，方程 (6) 离散成

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 0 & -A \\ A & 0 \end{pmatrix} z, \qquad A = \begin{pmatrix} -\tau_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -\tau_2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \tau_N \end{pmatrix}, \tag{7}$$

其中

$$\tau_k = 2 - a(p_k^2 + q_k^2)\Delta x^2, \quad k = 1, 2, \cdots, N, \qquad z = \big(p_1, p_2, \cdots, p_N, q_1, q_2, \cdots, q_N\big)^T.$$

方程 (6) 变为 $\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} = A(z)z$，$A(z)$ 是斜对称矩阵。方程 (6) 的解有 $\|z(t)\| =$ 常数，$\|\cdot\|$ 表向量范数。

3 Magnus 方法

设流形 M 上的常微分方程

$$Y' = A(t)Y, \quad t \geq 0, \quad Y(0) \in G, \tag{8}$$

其中 $A : \mathbf{R} \to g$ 和 $A(t)$ 是反对称矩阵，$A \in g$ 和 $Y \in G$，(G 表示一个群，g 为相应的李代数)。方程 (8) 的解为 $Y(t) = \exp\big(\Theta(t)\big)Y_0$，$t \geq 0$，其中

$$\Theta' = \mathrm{dexp}_{\Theta}^{-1} A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} a\mathrm{d}_{\Theta}^{k} A, \quad t \geq 0, \quad \Theta(0) = O, \tag{9}$$

$\{B_k\}_{k\in Z^+}$ 是 Bernoulli 数。用 Picard 迭代解方程 (9)，得到 $\Theta^0(t)=O$，

$$\Theta^{[m+1]}(t)=\int_0^t \mathrm{dexp}^{-1}_{\Theta^{[m]}(\xi)}A(\xi)\mathrm{d}\xi=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{B_k}{k!}\int_0^t a\mathrm{d}^k_{\Theta^{[m]}(\xi)}A(\xi)\mathrm{d}\xi,\quad m=0,1,\cdots. \tag{10}$$

如 $\Theta^{[1]}(t)=\int_0^t A(\xi_1)\mathrm{d}\xi_1$ 和

$$\begin{aligned}\Theta^{[2]}(t) &= \int_0^t A(\xi_1)\mathrm{d}\xi_1-\frac{1}{2}\int_0^t\Big[\int_0^{\xi_1}A(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,A(\xi_1)\Big]\mathrm{d}\xi_1\\ &+\frac{1}{12}\int_0^t\Big[\int_0^{\xi_1}A(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2\Big[\int_0^{\xi_1}A(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,A(\xi_1)\Big]\Big]\mathrm{d}\xi_1+\cdots.\end{aligned} \tag{11}$$

由 Picard 定理可知 $\Theta(t)=\lim\limits_{m\to\infty}\Theta^{[m]}(t)$ 在初始值的一个小邻域存在，迭代表明 $\Theta(t)$ 能用矩阵 A 以积分和交换算子的线性形式展开[4]，即 Magnus 展开

$$\Theta(t)=\sum_{k=0}^{\infty}H_k(t),$$

H_k 是一个包含 $k+1$ 阶重积分的线性组合，如

$$H_0(t)=\int_0^t A(\xi_1)\mathrm{d}\xi_1,\quad H_1(t)=-\frac{1}{2}\int_0^t\Big[\int_0^{\xi_1}A(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,A(\xi_1)\Big]\mathrm{d}\xi_1.$$

对 Magnus 展开中的积分形式进行数值积分，取

$$I_1(t)=\int_0^t A(\xi)\mathrm{d}\xi,\quad I_2(t)=\int_0^t\int_0^{\xi_1}\big[A(\xi_2),A(\xi_1)\big]\mathrm{d}\xi,$$

$$I_3(t)=\int_0^t\int_0^{\xi_1}\int_0^{\xi_1}\Big[A(\xi_2),\big[A(\xi_3),A(\xi_1)\big]\Big]\mathrm{d}\xi,\quad I_4(t)=\int_0^t\int_0^{\xi_1}\int_0^{\xi_2}\Big[\big[A(\xi_3),A(\xi_2)\big],A(\xi_1)\Big]\mathrm{d}\xi.$$

每一个 Magnus 展开项表示为 $I(h)=\int_S L\big(A(\xi_1),A(\xi_2),\cdots,A(\xi_s)\big)\mathrm{d}\xi$，$L$ 是一个多项式，S 是求积区间内离散点的集合

$$S=\big\{\xi\in\mathbf{R}^s:\xi_1\in[0,h],\ \xi_l\in[0,\xi_{m_l}],\ l=2,3,\cdots,s\big\},$$

$$m_l\in\{\,1,2,3,\cdots,l-1\,\},\quad l=2,3,\cdots,s.$$

按如下方式离散 $I(h)$。取 v 个积分点 $c_1,c_2,\cdots,c_v\in[0,1]$，令 $A_k=hA(c_kh)$, $k=1,2,\cdots,v$ 可得积分

$$K(h)=\sum_{k\in C_s^v}b_kL(A_{k_1},A_{k_2},\cdots,A_{k_s}),$$

C_v^s 是集合 $\{1,2,\cdots,v\}$ 中元素所组成的集合，其中 $b_k=\int_{\widetilde{S}}\prod_{i=1}^s l_{k_i}(\xi_i)\mathrm{d}\xi$ 和

$$\widetilde{S}=\big\{\xi\in\mathbf{R}^s:\xi_1\in[0,1],\ \xi_l\in[0,\xi_{m_l}],\ l=2,3,\cdots,s\big\},$$

以及

$$l_j(x)=\prod_{i=1,i\neq j}^{v}\frac{x-c_j}{c_i-cj},\quad j=1,2,\cdots,v$$

是由积分点构成的插值多项式

$$\widetilde{A}(t)=h^{-1}\sum_{-1}^{v}l_k\Big(\frac{t}{h}\Big)A_k$$

取代 $A(t)$，并数值积分，有 $\int_0^h A(t_1)\mathrm{d}t_1\approx\frac{1}{2}h(A_1+A_2)$,

$$\int_0^h\int_0^{t_1}\big[A(t_1),A(t_2)\big]\mathrm{d}t_2\mathrm{d}t_1\approx-\frac{\sqrt{3}}{6}h^2[A_1,A_2],$$

$$\int_0^h\int_0^{t_1}\int_0^{t_1}\big[A(t_1),[A(t_2),A(t_3)]\big]\mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_2\mathrm{d}t_1\approx h^3\Big[\Big(\frac{3}{80}-\frac{\sqrt{3}}{48}\Big)A_1-\Big(\frac{3}{80}+\frac{\sqrt{3}}{48}\Big)A_2,[A_1,A_2]\Big],$$

$$\int_0^h\int_0^{t_1}\int_0^{t_1}\big[[A(t_1),A(t_2)],A(t_3)\big]\mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_2\mathrm{d}t_1\approx h^3\Big[\Big(\frac{3}{80}+\frac{\sqrt{3}}{16}\Big)A_1-\Big(\frac{3}{80}-\frac{\sqrt{3}}{16}\Big)A_2,[A_1,A_2]\Big].$$

$A_1=A((\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{6})h)$，$A_2=A((\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{3}}{6})h)$。用 $A(t,y)$ 取代 $A(t)$，用 Lagrangian 多项式

$$\widetilde{A}(t,y)=h^{-1}\sum_{k=1}^{v}l_k\Big(\frac{t}{k}\Big)A_k,\quad A_k=hA(c_kh,X_k),\quad k=1,2,\cdots,v,$$

$$K_l(h)=\sum_{j\in C_s^v}a_{l;j}L(A_{j1},A_{j2},\cdots,A_{js}),\quad a_{k;j}=\int_{\widetilde{S}_k}\prod_{i=1}^{s}l_{ji}(\xi_i)\mathrm{d}\xi,$$

$$\widetilde{S}_k=\big\{\xi\in\mathbf{R}^s:\xi_1\in[0,c_k],\ \xi_l\in[0,\ \xi_{m_l}],\ l=2,3,\cdots,s\big\}.$$

显式积分，可得解常微分方程组

$$\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}t}=A(t,Y)Y,\quad Y(0)=Y_0,\quad A(t,Y)=-A^T(t,y) \tag{12}$$

的三阶显式 Magnus 方法

$$\begin{aligned}&\Theta=\frac{1}{6}(A_1+4A_2+A_3)-\Big[A_1-A_3,\frac{1}{15}A_2+\frac{1}{60}A_3\Big],\\&Y^{n+1}=\mathrm{e}^{\Theta}Y^n,\end{aligned} \tag{13}$$

这里

$$A_1=hA(t_n,Y^n),\quad A_2=hA\Big(t_n+\frac{h}{2},\mathrm{e}^{A_1}Y^n\Big),$$

$$A_3=hA\big(t_n+h,\mathrm{e}^{(-A_1+2A_2)}Y^n\big),\quad [A,B]=AB-BA.$$

利用格式 (13) 解方程 (12)，方程 (12) 的数值解具有 $\|Y^n\|=\|Y^0\|$ 的守恒特性[4]。

4 数值试验

为了测试显式 Magnus 方法能否保离散的非线性 Schrödinger 方程的模守恒特性，定义模平方和误差

$$\mathrm{Err}(t)=\big(Y_1^2(0)+Y_2^2(0)+\cdots+Y_{2N}^2(0)\big)-\big(Y_1^2(t)+Y_2^2(t)+\cdots+Y_{2N}^2(t)\big),\quad t=nh,$$

初始条件 $\psi(x,0) = \text{sech}(x)$, $x \in [-20,20]$。在图1中，取 $a = 2$，图1的右边是 $h = 0.03$ 时用 Runge-Kutta(RK) 方法解方程 (7) 得到的模平方和误差，误差有明显增长，图1的左边是在 $h = 0.1$ 时用 Magnus 方法解方程 (7) 得到的模平方和误差，误差仅达 10^{-12}，可忽略。在图2中，图2的右边是 $h = 0.375$ 时用 RK 方法解方程 (7) 得到的模平方和误差，方程的模平方和趋向无穷大，受步长限制不收敛。图2的左边是 $h = 0.8$ 时用 Magnus 方法解方程 (7) 得到的模平方和误差，误差仍仅达 10^{-12}。在很大步长下，该方法都稳定。从图 1-2 知，Magnus 方法能保 Schrödinger 方程的模平方守恒，而相应阶显式RK 方法不能保 Schrödinger 方程的模平方守恒，同时 Magnus 方法比相应RK方法在稳定性方面优越。Magnus 可应用到类似模守恒方程，如 Kdv 方程，耦合 Schrödinger 方程等。

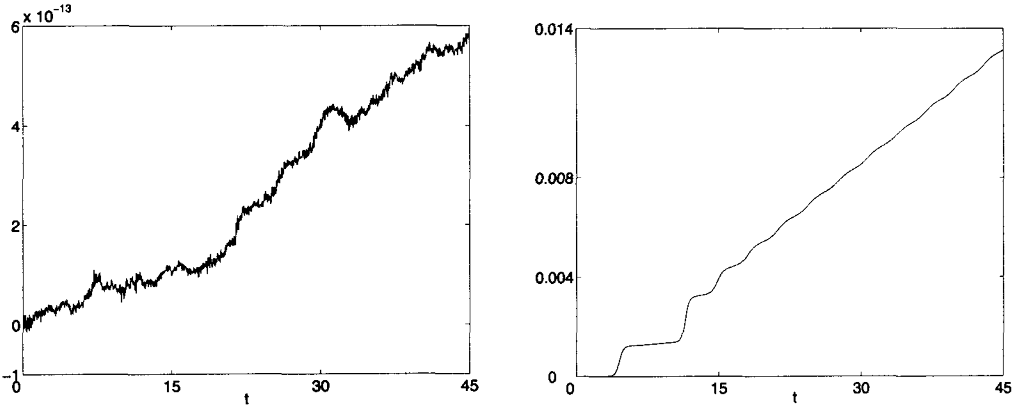

图 1:　用 Magnus 方法和 RK 方法得 Schrödinger 方程在 $t \in [0, 45]$ 的模平方和误差

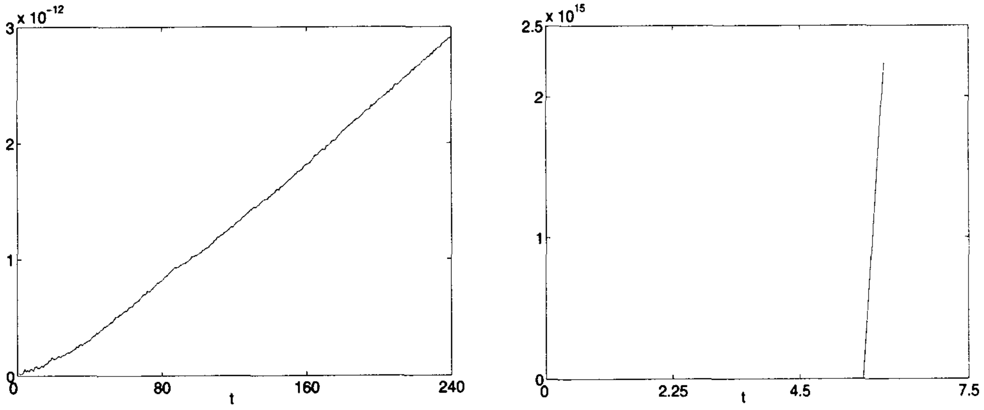

图 2:　在不同时间步下 Magnus 方法和 RK 方法得 Schrödinger 方程的模平方和误差

参考文献：

[1] Sanz-Serna J M, Verwer J G. Conservation and nonconservation schemes for the solution of the nonlinear Schrödinger equation[J]. Numer Anal, 1986, 6: 25-42

[2] Zhang L M, Chang Q S. A conservation numerical scheme for nonlinear Schrödinger equation[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 1999, 16: 661-668

[3] Zhang F, Victor M. Pérez-Garcia and Luis Vázquez, numerical simulation of nonlinear Schrödinger systems: a new conservative scheme[J]. Applied Mathematics and Computation, 1995, 71: 165-177

[4] Iserles A, *et al.* On the implemtation of the method of Magnus series for linear differential equations[J]. BIT, 1999, 39: 281-304

[5] 王斌，季仲贞. 显式完全平方守恒差分格式的构造及其初步检验[J]. 科学通报，1990, 35(10): 766-768
Wang B, Ji Z Z. Construction of explicit square conservation difference scheme and its preliminary examination[J]. Chinese Science Bulletin, *1990*, *35(10)*: *766-768*

Explicit Modulus Conserving Scheme for the Nonlinear Schrödinger Equation

SUN Jian-qiang[1], QIN Meng-zhao[2]

(1- College of Information Science and Technology, Hainan University, Haikou 570228;
2- Institute of Computational Mathematics, Chinese Academy of Science, Beijing 100080)

Abstract: This paper applies apply the Magnus method to solve the nonlinear Schrödinger equation. The nonlinear Schrödinger equation has the modulus conserving property. The nonlinear Schrödinger equation is discretizated in the spacial direction by the proper difference scheme, which is transformed into the ordinary differential equations. The ordinary differential equations are solved by the Magnus method. Numerical results show that the Magnus method have the advantage of the modulus conserving property of the nonlinear Schrödinger equation and its good stability. The Magnus method can be applied to other modulus conserving differential equations.

Keywords: *nonlinear Schrödinger equation*; *Magnus method*; *modulus conserving scheme*

Received: 07 July 2006. **Accepted:** 13 June 2007.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (10401033; 10471145); the Scientific Research Foundation of Hainan University.